

MLF の概要と来年度の展望

Current Status and Future in MLF

金谷利治
J-PARC MLF

大型陽子加速器施設(J-PARC) 物質・生命科学実験施設(MLF)では、400 MeV ライナック, 3GeV RSC (rapid cycle synchrotron)により加速された陽子を用い、パルス状の中性子およびミュオンを発生させ、物質・生命科学を始めとする多くの分野の研究を進めている。2015 年の 2 回の中性子標的の不具合の後、200 kW, 150kW の低出力ではあるが、90%を超える稼働率で安定運転を続け、利用者にはビームを供給し続けている。2017 年の夏季メンテナンス期に新たな中性子標的 8 号機に交換をし、10 月からは 300 kW で、2018 年 1 月からは 400 kW で運転を続けている。この安定運転に支えられ、MLF において全個体電池の開発、シリコンを使わない太陽電池の開発など、サイエンス的にも社会的にも重要で素晴らしい成果を創出している。

2018 年度の夏季メンテナンス期においては、さらに新たな中性子標的 10 号機への交換を行い、500 kW 以上の出力を目指しつつ、安定運転を続ける決意である。我々の施設は世界中に開かれた施設であり、素晴らしいサイエンスや産業利用のテーマを持った利用者に実験をしていただき、利用者と協働して成果を出してゆくユーザー施設である。常に世界最高性能の技術で中性子、ミュオン装置を維持し、ユーザー開拓を進め、ユーザーと連携し、また他の多くの国内外の先端施設や大学と連携することによって、質・量ともに世界最高の成果を目指す。

中性子標的容器の高出力対応化の現状

Present status of design improvement and R&D for high power operation of J-PARC neutron target vessel

羽賀勝洋、涌井隆、若井栄一、直江崇、粉川広行、高田弘
日本原子力研究開発機構 J-PARC センター

2015 年に発生した中性子標的容器の不具合を教訓として、設計、製作、検査方法を全面的に見直し、堅牢性・信頼性を向上させた新しい中性子標的容器が MLF において運転中である。昨年 10 月に 300 kW で始まった運転は、平成 30 年 1 月から 400 kW に移行し、4 月からは 500 kW 出力を予定している。この中性子標的容器は、熱応力の制限から利用運転に供する最大出力を 700kW としているが、次の標的容器では、J-PARC の目標である 1 MW 運転を可能とするため、熱応力を低減する新たな冷却水流路と構造の設計を行い、現在製作中である。

具体的には、熱応力の高い中性子標的容器の前半部が、現在運転中の中性子標的容器では水銀を内包する水銀容器と、これを覆う水冷式の保護容器を一体成型した構造であるのに対し、新しい構造では水銀容器と保護容器を分離するとともに、保護容器の各部位ごとに冷却水流路の配置を変えることで冷却性能を調整し、容器の熱膨脹差で生ずる熱応力を大幅に低減している。

また、全体の部材数を減らすように製作設計を行い、各部材はワイヤー放電加工を用いてブロック状の材料から成型することで溶接箇所を大幅に減らすとともに、溶接箇所の一部に電子ビーム溶接を新たに導入し、溶接に伴う変形・残留応力をより一層低減した。さらに、製作・組立段階から主要な溶接工程で放射線検査、超音波検査を積極的に導入し、溶接部の健全性を確認している。

中性子標的容器の高出力化でもう一つの重要な課題となっている圧力波によるキャビテーション損傷に関しては、微小気泡を注入せずに 150 kW～200 kW の出力で使用した使用済み中性子標的容器から試験片を切り取って損傷深さを計測し、気泡の無い条件における損傷予測の精度を向上させるデータが得られた。また、今後の高出力化へ向けた損傷低減化手法の R&D として、ビーム窓の構造を改良するための水流動実験なども実施している。

本発表では、高出力化へ向けた新たな水銀ターゲット容器の設計・製作と R&D の現状について報告する。

J-PARC MLF 重水素化試料作製環境の紹介

Introduction of Deuterated Sample Preparation at J-PARC MLF

阿久津 和宏¹、安達 基泰²、高田 慎一³、青木 裕之³

¹ 総合科学研究機構(CROSS)

² 量子科学技術研究開発機構

³ 日本原子力研究開発機構

J-PARC MLF では安定した大強度パルス中性子の供給が実施されており、現在までに数多くの中性子線を用いた先導的な研究が展開されている。生命・化学の中性子研究においては中性子線が水素に敏感であり、またその同位体である重水素を使うことで試料のコントラストを変えることが可能であるため、X 線などでは見えない構造を観るための手法として重要な役割を担っている。特に、有機分子の水素をその同位体である重水素でラベル化する手法は、試料のコントラスト変調、部分選択的構造解析、水素の非干渉性散乱に由来するバックグラウンド信号の低減など多くの利点があり、中性子研究を更に高度なものへと昇華する手法として重要な役割を担っている。そのため、重水素ラベル化分子は世界各地の中性子施設で多用されており、それらを合成するための重水素化実験室(重水素化ラボ)も中性子施設に併設されていることが多い。

J-PARC MLF においても中性子研究の成果最大化に向けた重水素化ラボの整備を進めている。中性子実験には多量の重水素ラベル化物質が必要となるため、重水素化ラボにはそのための機器類を整備する必要がある。そこで、2017 年 10 月に Deuterated Materials Enhancing Neutron Science for Structure Function Applications と題した J-PARC Workshop を開催し、J-PARC 中性子ユーザーにとって魅力的な機器・システム・環境などについて議論した。その他にも、国内外の研究者と意見交換を行っており、重水素化試料の作製環境が整いつつある状況である。本発表では、J-PARC MLF の重水素化ラボの現状と海外の重水素化施設、特にオーストラリア(ANSTO)とヨーロッパ圏内の重水素化活動の現状について紹介する。

共通試料環境機器の現状と今後の予定

Current status and plan of the common sample environment equipment

渡辺真朗¹・奥隆之¹・河村聖子¹・高田慎一¹・高橋竜太¹・酒井健二¹・
山内康弘²・中村雅俊²・宗像孝司³・石角元志³・坂口佳史³・大内啓一³・
吉良弘³・相澤一也¹

1 日本原子力研究開発機構, J-PARC センター

2 日本アドバンステクノロジー

3 総合科学研究機構, 中性子科学センター

J-PARC 物質生命科学実験施設には、各ビームライン(BL)の装置としてそれぞれ標準の試料環境(SE)機器を所有する一方、試料環境機器(SE)チームが組織され、BL 共通試料環境機器の整備および利用支援を行っている。使用頻度は高くないが必要不可欠な機器や、各 BL で個別に整備するには非常に高価なものや、運転に専門の知識や技術を要するものなどが BL 共通 SE 機器に含まれる。SE チームは、(1)低温&磁場、(2)高温、(3)高圧、(4)ソフトマター、(5)パルスマグネット、(6)光照射、(7)3He スピンフィルターのサブチームで構成されている。本発表では、SE チームが取り組んでいる BL 共通試料環境機器整備の現状と今後の予定等について説明する。

施設報告計算環境 MLF におけるリアルタイムデータ処理

Status of A Live Data Reduction at MLF

稲村泰弘¹, 安芳次², 大下英敏², 笠井聡³, 中谷健¹, 伊藤崇芳³,
岡崎伸生³, 森山健太郎³, 鈴木次郎², 瀬谷智洋², 大友季哉²

1. J-PARC センター、2. KEK、3. CROSS 中性子科学センター

MLF 計算環境は、MLF におけるソフトウェアに関するインフラストラクチャー開発を主に担ってきた。例えば、ビームラインのデータ収集システム(DAQ ミドルウェア)や装置制御ソフトウェア(IROHA)、データ処理環境(万葉ライブラリ・空蟬など)の開発・提供を行なっている。一方で、データの安全な管理や再利用のためのデータベース開発や、ユーザーが外部から解析環境を利用できるリモートアクセス環境の開発など、ユーザーエクスペリエンスの向上もその役割に含まれている。

最近の成果としては、リアルタイムデータ処理(Live Data Reduction)の進展が挙げられる。MLF ではこれまで、測定中のデータをその場で解析してすぐに結果を見たいという強い要望があったにもかかわらず、十分に対応することができていなかった。そこで MLF 計算環境では、リアルタイムな情報取得や測定データ処理(Live Data Reduction)を安定かつ安全に実行できる環境を目指し、既存のデータ収集システム(DAQ ミドルウェア)と世界で広く使用されている技術である分散メッセージングミドルウェア(Redis)を組み合わせたシステムの開発を一昨年度より取り組んで来た。

本年度でデータ収集系システムの基本開発はほぼ終了しており、すでにいくつかの MLF ビームラインによって導入され検証も進みつつある。特に BL21 (NOVA) 装置ではいち早くこのシステムを導入し、ユーザーに対しリアルタイムにデータを可視化し、実験中に静的構造因子の確認ができるようになっていく。また他の装置でも試験的にシステムの導入を進めており積極的な動作検証が始まっている。例えば時間のかかっていた二次元検出器の出力を簡便にマップ表示できる機能を実装したビームラインもある。さらに、いくつかの装置のデータ処理基盤ソフトウェアとなっている「空蟬」もこのシステムに対応し、既存のデータリダクション関数を用いて多段階のデータ処理をほぼリアルタイムに進めることができるようになりつつある。

本講演では、この Live Data Reduction の進展と今後の展開などについて述べる。

負ミュオン捕獲X線によるリチウム電池の非破壊分析 Non-Destructive Analysis of Li-Battery with Negative Muon Beam

反保 元伸, 濱田 幸司, 土居内 翔悟, 山重 寿夫^A,
梅垣 いずみ^B, 樋口 雄紀^B, 稲垣 誠^C, 南部 明弘^C,
二宮 和彦^C, 久保 謙哉^D, 三宅 康博

高エネ研 物質構造科学研究所 ミュオン科学研究系,
A トヨタ自動車, B 豊田中央研究所, C 大阪大学大学院理学研究,
D 国際基督教大学

負の電荷をもつミュオンは、物質中に打ち込まれ減速すると急速に原子核に捕われ、「負ミュオン原子」が形成される。負ミュオン原子からは元素に固有な特性 X 線を放出する。この特性 X 線(負ミュオン捕獲 X 線)エネルギーは、電子特性 X 線エネルギーに比べ 200 倍高い。さらに負ミュオン原子形成する深さ方向における空間分布を数 10 μm オーダの幅に「局在」させることができる。このことを応用すれば、電子特性 X 線が試料の外部まで放出できない厚みを持ち、かつ深さ方向に元素の濃度分布が変化するような試料に対して、試料内ミュオン停止深さを変化させて、試料外部に放出する負ミュオン捕獲 X 線のエネルギースペクトルを計測すれば、試料内部における元素濃度分布が非破壊で分析できる。

本研究では、実用リチウム電池内部で充電・放電により正極—負極間を移動するリチウムの空間分布について負ミュオンを用いた非破壊分析を行った。厚み約 100 μm 厚をもつ正極中を約 20 μm 厚毎に、負ミュオンを打ち込み、各停止層から放出する負ミュオン捕獲 X 線を計測した。その結果リチウムは電極に近いほど多く分布し、かつ充放電によりリチウムの増減を示唆するデータを確認できた。本公演ではその詳細について述べる。

本研究は文部科学省「光・量子融合連携研究開発プログラム」の「実用製品中の熱・構造・磁気・元素の直接観察による革新エネルギー機器の実現」の研究成果である。

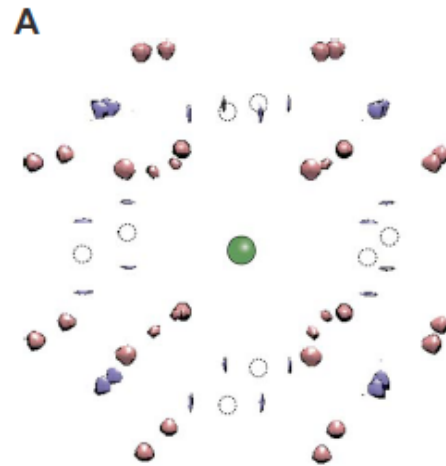
中性子の新しい使い方：中性子ホログラフィーによるドーパント周りの原子配置の観測

Local Structure Investigations around Dopants by Neutron Holography in J-PARC

大山研司^{1,2}, 福本陽平¹, 上地昇一², 金澤雄輝², 林好一³, 八方直久⁴,
木村耕治³, 細川伸也⁵, 波田拓馬⁴, B. Paulus^c, J. Stellhorn^c,
M. Lederer^a, 原田正英⁶, 稲村泰弘⁶, 松浦航¹, 伊賀文俊^{1,2}, 筒井一生⁷,
P. Wellmann⁸

1 茨城大院理工, 2 茨城大工, 3 名工大院工, 4 広島市大院情報,
5 熊本大院先端, 6 J-PARCセンター, 7 東工大未来研, 8 Erlangen大学

材料科学や固体物理学においては、異種元素ドーピングで物性を制御する事が多い。従って、構造物性の観点からはドーパント周りでの結晶構造の変化（局所構造）が重要なのは明らかだが、局所構造に並進対称性がなく通常の回折法で観測できないことからその理解は十分ではない。我々は、原子局所構造を可視化する手法として、また J-PARC での新しい測定原理として、白色中性子ホログラフィーを開発している。ホログラフィー



を開発している。ホログラフィーはすでに X 線と光電子線で実用化されており、次の特色がある。1) 特定の元素近傍の原子構造を 3 次元的に観測可能。2) 中心元素から 10-20Å の広い範囲を観測可能。3) 回折実験と異なり、モデルなしで原子像が得られる。一方、機能性材料において軽元素の役割は重要であり、中性子への展開は材料科学に大きなインパクトがある。J-PARC の MLF の BL10 で実験を行い、代表的シンチレーション結晶である Eu ドープ CaF_2 において、図 1 に示すような Eu 周りの 3D 局所構造の可視化に成功し、Eu ドープにより Ca 位置に異常が起きること、Eu 周りに過剰 F が存在し系ており、これが電気的中性を維持していることを示した。[Hayashi et al., Sci. Adv., 2017]。現在、B ドープ Si、Sm ドープ LaB_6 の局所構造観測を進めている。講演では、局所構造理解の重要性、ホログラフィーの原理、最近の成果について報告する。

図 1 1% Eu ドープ CaF_2 の Eu（中心）まわりの原子配置 [Hayashi et al., Sci. Adv., 2017]。

数学のグラフ解析の結晶構造解析への適用

Lattice determination based on graph analysis

富安(大石)亮子・山形大学/JST さきがけ
神山崇・高エネルギー加速器研究機構

粉末指数付けソフトウェア CONOGRAPH(コノグラフ)[1]の原理の紹介を行う。CONOGRAPHは、既存の代表的ソフトウェア TREOR, DICVOL と比較したとき、同程度もしくはより少ない徹底探索時間において、成功率を 20%以上向上させたソフトウェアである[2]。使用したテストデータは質の悪いデータも含むため、他ソフトウェアが 6--8 割成功する状況で 100%の成功率を実現したと考えてよい。開発にあたっては、ab-initio indexing[2], ピークサーチ[1]を含む 4つの異なる解析ステージに対し、それまでの状況を改善する新しい方法の提案も行った ([3], [4]など)。数学の持つ一般性から、粉末回折のために開発されたこれらの方法は、電子線後方散乱回折にも適用が開始されている。講演では、ab-initio indexing の部分を中心に紹介する。

実験データから抽出される結晶格子に関わる情報は、各回折装置の幾何学的状況により異なるが、粉末の場合、各ミラー指数の格子面間隔(逆格子を考えれば、 d^* 値と呼ばれる逆格子ベクトルの長さ)が得られる。結晶構造解析の基盤は、応用数学で連続最適化と総称される分野の様々な方法になるが、一般に離散構造を扱う場合、その方法が有効でないことがあり、格子決定を行う粉末指数付けにおいても同様の状況が発生する。

そこで我々は、実験データから得られた d^* 値が形成するネットワークをグラフ(図 1)で表現し、消滅則の問題、バックグラウンドノイズに伴うピークの消失、不純物ピークなどを処理する統計・数学的議論を、このグラフ上において実行する、という方法を取った。この離散数学に基づく方法は、消滅則に伴う状況とも相性がよく、対称性による場合分けを必要としない手法開発に有効であることが確認できた。

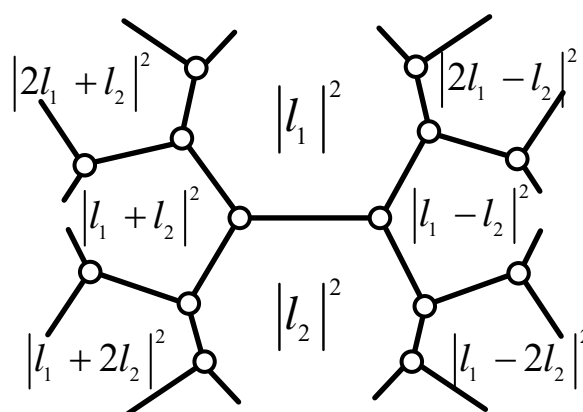


図 1 手法開発に用いたトポグラフ

- [1] A. Esmacili, T. Kamiyama, R. Oishi-Tomiyasu, J. Appl. Cryst. 50 (2017), pp. 651-659. (CONOGRAPH のダウンロードページ: <https://z-code.kek.jp/zrg/>)
- [2] R. Oishi-Tomiyasu, Acta Cryst. A69 (2013), pp. 603—610.
- [3] R. Oishi-Tomiyasu, J. Appl. Cryst. 47 (2014), pp. 2055--2059.
- [4] R. Oishi-Tomiyasu, Acta Cryst. A68 (2012), pp. 525—535.

3D characterization of crystalline and magnetic structures using Neutron and X-ray imaging

Søren Schmidt¹,

¹ Department of Physics, Technical University of Denmark

The 3DXRD (Three Dimensional X-ray Diffraction) methodology [1] for non-destructive characterization of individual grains in polycrystalline materials at the micrometer length scale has been around for almost two decades. Although initially motivated by materials science, especially within metallurgy, a wide range of other fields such as geology, structural biology and chemistry, have benefitted from this technique. Recently, a complementary technique, 3DND (3D Neutron Diffraction) [2], for imaging crystalline structures with time-of-flight neutrons has been achieved using the single crystal diffractometer SENJU at J-PARC combined with an imaging detector. Moreover, with the availability of the polarimetric setup at the new imaging beamline RADEN at J-PARC a novel technique 3DPNT (3D Polarized Neutron Tomography) [3] for measuring 3D magnetic fields in the interior of materials has been established. The talk will give an overview of the current state of the 3DXRD, 3DND and 3DPNT methodologies along with applications.

References:

- [1] H.F. Poulsen, S.F. Nielsen, E.M. Lauridsen, S. Schmidt, R.M. Suter, U. Lienert, L. Margulies, T. Lorentzen, D. Juul Jensen, Three-dimensional maps of grain boundaries and the stress state of individual grains in polycrystals and powders. *J. Appl. Cryst.* (2001) **34**, 751-756.
- [2] A. Cereser, M. Strobl, S. Hall, A. Steuwer, R. Kiyonagi, A. Tremsin, E.B. Knudsen, T. Shinohara, P. Willendrup, A. Bastos da Silva Fanta, S. Iyengar, P.M. Larsen, T. Hanashima, T. Moyoshi, P.M. Kadletz, P. Krooß, T. Niendorf, M. Sales, W.W. Schmahl, S. Schmidt, Time-of-Flight Three Dimensional Neutron Diffraction in Transmission Mode for Mapping Crystal Grain Structures, *Sci. Rep* (2017), DOI:10.1038/s41598-017-09717-w.
- [3] M. Sales, M. Strobl, T. Shinohara, A. Tremsin, L.T. Kuhn, W. Lionheart, N. Desai, A.B. Dahl, S. Schmidt, Three Dimensional Polarimetric Neutron Tomography of Magnetic Fields, *Sci Rep* (2018), *accepted*.

中性子イメージングと組み合わせた 金属板材の弾塑性解析法の開発

Development of a neutron elasto-plastic analysis method of metal board material

鈴木淳市¹, 張朔源¹, 林田洋寿¹, 桐山幸治¹, 及川健一², 篠原武尚²
CROSS¹, J-PARC センター²

MLF-SciTech (Science & Technology in MLF) の構造敏感物性・長周期構造物性研究グループでは、鈴木淳市、大石一城、林田洋寿、張朔源、桐山幸治、伊藤崇芳、河村幸彦、森川利明（以上、CROSS）が「中性子小角散乱法の開発と応用」、「中性子小角・広角散乱データの同時解析法の開発と応用」、「軽元素の有効利用による革新鋼材の開発」、「カイラル磁性体の研究」、「超伝導体の磁束挙動の研究」、「構造材料加工プロセスその場測定の時時解析・可視化ソフトウェア開発」、「金属板材の中性子弾塑性解析法の開発と応用」に関する研究を進めている。本シンポジウムでは研究グループの概要を紹介するとともに、この中から特に J-PARC センターの及川健一、篠原武尚両博士と共同で進める標記の研究について紹介する。

近年、軽量化、安全性向上等の点から高強度材料の利用が進んでいる。しかし、高強度材料には加工性が低くなるという課題がある。様々な形に加工される板材では加工の際にどのような変形挙動が見られるのか？我々はその微視的理解を目指して二軸引張試験機と中性子ブラッグエッジイメージング法を組み合わせた解析法の開発を進めている。

実験機器としてエネルギー分析型中性子イメージング装置「螺鈿」に縦置き設置できる二軸引張試験機（最大荷重：50kN）を開発した。中性子実験では 540MPa 級熱延高張力鋼板（厚み：3.2mm、降伏点：463MPa、引張強度：603MPa）の十字形試験片を観測した。約 30mm 角の観測面に対して、無負荷状態、弾性変形状態、塑性変形状態、除荷状態のブラッグエッジプロファイルを取得し（弾性変形状態、塑性変形状態の負荷状態では応力比 $\sigma_x : \sigma_y = 1 : 1$ や $4 : 1$ （x 方向が圧延方向）の二軸引張応力を印加）、このプロファイルから格子面間隔とブラッグエッジの幅の二次元分布を求めた。負荷状態では無負荷状態と比べて試験片の厚み方向の格子面間隔が縮み、ブラッグエッジの幅が広がる結果が得られた。ブラッグエッジの幅の広がりとは転位密度の増大によると思われるが、その定量性の検証やこれらの量の二次元分布の妥当性の検証は今後の課題である。

乱れた構造がもたらす機能性発現のメカニズム

Mechanism of the function expression caused by disordered structure

川北至信¹・Bing Li¹・川崎卓郎¹・菊地龍弥¹・鬼柳亮嗣¹・稲村泰弘¹・大原高志¹・柴田薫¹・古府麻衣子¹・中村充孝¹・鈴谷賢太郎¹・坂口佳史²・松浦直人²・花島隆泰²・阿久津和宏²・米村雅雄³・大友季哉³・田原周大⁴・丸山健二⁵・島倉宏典⁶

1 原子力機構 J-PARC、2 CROSS 中性子科学センター、3 高エネルギー機構、4 琉球大、5 新潟大、6 新潟薬科大

JAEA が施設枠のビームタイムの中で実施している JAEA プロジェクト課題「乱れた構造がもたらす機能性発現のメカニズム」において、得られた研究成果をダイジェストする。本プロジェクトでは液体やガラスなど構造全体が不規則なランダム物質に対して用いられてきた研究手法・解析手法を、結晶に潜むランダム性がマクロな機能的物性を支配する物理現象に適用し、機能性発現のメカニズムを解き明かしていくことを目的として、研究を展開してきた。

そのような手法として非弾性散乱・準弾性散乱によって得られる動的構造因子 $S(Q,E)$ を実時間・実空間に焼き直して、局所構造の動的な振る舞いを理解する動的相関関数を用いた研究例を紹介する。液体ビスマスは複雑な構造を有する短元素液体金属であり、その複雑性の起源が議論のまよになってきた。J-PARC MLF の AMATERAS(BL14)を用いてマルチ E_i 手法で測定された測定領域・エネルギー分解能の異なる複数の $S(Q,E)$ から、すべてを満たす時空相関関数 $P(r,t)$ を最大エントロピー法を利用して逆問題を解くアプローチにより得た。その結果、二重層状構造を持つ A7 構造という結晶構造から提唱されている Peierls 歪が液体中にも残存しているとする説を裏付ける構造緩和現象を観測できた[1]。

機能性物質としては、エネルギー変換デバイスとして期待される熱電材料の AgCrSe_2 [2]と太陽電池素材の $\text{MAPbI}_3(\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3)$ [3]について、ともに好ましい性質である低熱伝導性の起源を中性子準弾性散乱・非弾性散乱から突き止めた研究を紹介する。

- [1] Y. Kawakita et al, Physica B (2018), in press, Available online from 16 December 2017, (6 pages) <https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.12.037>
- [2] B. Li et al, Nature Materials in press (2018) /DOI 10.1038/s41563-017-0004-2 published online 15 January 2018 (6 pages)
- [3] B. Li et al, Nature Communications. 8 (2017), 16086 (9 pages), DOI: 10.1038/ncomms16086.

水素化物の規則—不規則構造解析

Analysis of ordered/disordered structure in hydrides

大友季哉^{1,2,3}、池田一貴¹、本田孝志¹、大下英敏¹、角田茉優³、鈴谷賢太郎⁴、川北至信⁴、社本真一⁵、樹神克明⁵、福永俊晴⁶、森一広⁶、小野寺陽平⁶、亀田恭男⁷、山口敏男⁸、吉田亨次⁸、丸山健二⁹、榊浩司¹⁰、Hyunjeong Kim¹⁰、中村優美子¹⁰、町田晃彦¹¹、服部高典⁴、伊藤恵司¹²

1 KEK 物構研中性子、2 総研大高工、3 茨城大、4 JAEA J-PARC センター、5 JAEA 量子ビーム、6 京大原子炉、7 山形大、8 福岡大、9 新潟大、10 産総研、11 量研機構、12 岡山大

物質中の水素は、生命活動から新規材料まで、様々な物性や機能を誘起する元素である。本プロジェクトは、KEK 物構研の S1 課題「全散乱法による水素化物の規則—不規則構造解析」を軸として、外部の研究者とプロジェクトを通じた連携により、中性子による水素（プロトン）の観測技術の向上を行いながら研究を推進している[1-6]。

本講演では、プロジェクトの概要に加えて、軽量かつ高容量の水素貯蔵材料候補であるグラファイト鋳型カーボンの 3 次元グラフェン構造の全散乱法を用いた構造解析[7]、バナジウム系合金の水素貯蔵性能劣化メカニズムの全散乱法と中性子非弾性散乱法を用いた研究等の成果について紹介する。

本研究の一部は、中性子共同利用 S 型実験課題(2014S06)、NEDO 水素利用技術研究開発事業、JST 光・量子融合連携研究開発プログラムの助成のもとで進められた。

- [1] A. Machida, et al., Phys. Rev. Lett., **108**, 205501, (2012).
- [2] M. Hiraishi, et al., Nature Physics, **10**, 300–303, (2014).
- [3] H. Akiba, et al., J. Am. Chem. Soc., **138**, 10238–43, (2016).
- [4] S. Iimura, et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A., **114**, E4354–E4359, (2017).
- [5] S. Takagi, et al., Angew. Chem. Int. Ed., **54**, 5650–5653, (2015).
- [6] S. Takagi, et al., Sci. Rep., **7**, 44253, (2017).
- [7] H. Nishihara, et al., Carbon, **129**, 854–862, (2018).

ミュオンの S1 実験エリアにおける元素戦略「電子材料」研究 Muon research on Electron Materials of Element Strategy at S1 experimental area

小嶋健児^{1,2}、平石雅俊¹、岡部博孝^{1,2}、幸田章宏^{1,2}、門野良典^{1,2}
KEK 物構研¹、J-PARC センター²

2012 年に募集された元素戦略プロジェクトでは、日本の産業競争力向上に大きな効果を発揮する材料領域として「磁石材料」「触媒・電池材料」「電子材料」「構造材料」の 4 分野が選定された。ミュオンに関しては、電子材料領域の東工大元素戦略に KEK 物構研の構造物性センターを通して参画し、その予算をいただいて S1 実験エリアに元素戦略 μ SR 分光器 (ARTEMIS) を製作・設置し、コミッショニング・手直しを経て元素戦略試料の測定に供されている。ビームタイムの裏付けは、S1 型ミュオン共同利用実験 (2013MS01) である。この S1 型課題も来年度最終年度を迎え、昨年度からビームタイムの相当割合を一般共同利用に提供している。

元素戦略においてミュオンに期待されていることは、高感度磁気プローブとして磁性を明らかにすることと、他の手法で観測が難しい「水素」の状態をシミュレートすることである。前者に関しては、東工大細野グループが発見した鉄系超伝導体 $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{H}_x$ (La-1111Hx) の磁気相図を明らかに、第 2 超伝導ドームのさらに高ドープ側に磁気秩序相を発見した仕事がある[1]。これはさらに圧力下で超伝導転移温度が上昇する謎に迫る仕事に発展している[2]。

後者に関しては、最近特に、ワイドギャップ半導体 In-Ga-Zn-O (IGZO) 系や ZnO に大きな進展があり、ミュオンを使って、これらの物質での格子間水素の位置を明らかにし、さらに水素がドナーとして振舞うことを明らかにした[3]。また、それに先立って、ミュオン測定した、カゴ状エレクトライド C12A7 マエナイトにおける水素状態も、O-H 結合 (ゼロドープ) からヒドリドイオン H⁻ 形成 (高電子ドープ) で理解でき[4]、酸化物半導体中の水素状態の理解がミュオンで進んでいる。

[1] M. Hiraishi *et al.*, Nat. Phys. **10**, 300–303, (2014).

[2] M. Hiraishi *et al.*, preprint (2017).

[3] K.M. Kojima *et al.*, preprint (2018).

[4] M. Hiraishi *et al.*, Phys. Rev. B., **93**, 121201(R), (2016).

動き始めた BL06 中性子共鳴スピンエコー分光器群 “VIN ROSE” Commissioning Status of BL06 VIN ROSE at MLF

遠藤仁^{1,2}、日野正裕³、小田達郎³

1 KEK-中性子、2 J-PARC センター、3 京大原子炉

中性子スピンエコー(NSE)法は、中性子スピンという自由度を用いることで、中性子の波長分散に依らずに散乱前後の非弾性散乱過程による中性子のエネルギー変化を精密測定する分光法である。従って入射ビーム強度を過度に落とす必要はなく、中性子非弾性散乱測定法において最高のエネルギー分解能(ピコ電子ボルト)を達成している。

MLF BL06において、京都大学-KEK連携により2台の中性子共鳴スピンエコー分光装置(NRSE 型及び MIEZE 型)の設置が進められている。NRSE 型では最大フーリエ時間 100ns 以上を目標としている。MIEZE 型では、最大フーリエ時間は NRSE 型より短いものの、試料位置で強い磁場を印加することが可能である等、従来の NSE では不可能であった特色ある実験が可能になることが期待されている。また、NRSE 型と MIEZE 型共に、J-PARC の中性子源の特徴である高ピーク強度のパルス中性子を用いることで、高効率で測定を行うことが出来る。我々ビーム建設チームは、装置名を VIN ROSE (Village of Neutron Resonance Spin Echo spectrometers、中性子共鳴スピンエコー分光器群)とし、新たな科学領域を切り拓くための実験装置及び手法として多くの中性子散乱ユーザーに利用して貰うべく、開発を進めている。

2014 年度にファーストビームを受け入れ、MIEZE 分光器から整備を進め、2017B 期から MIEZE 分光器を利用しての一般課題公募を開始した。NRSE 分光器では、位相補正デバイスとして、長さ 90cm、焦点間距離 250cm の2次元回転楕円体スーパーミラーを理研と共同で開発し、現在性能評価を進めている。

発表では、MIEZE 分光器で行われている実験例と、NRSE 分光器の開発状況の詳細を述べる予定である。

中性子散乱装置 POLANO

Polarized Neutron Spectrometer POLANO

横尾 哲也・高エネルギー加速器研究機構

POLANO プロジェクトは偏極中性子散乱研究に特化した非弾性散乱装置 POLANO を建設し、偏極度解析を利用した物性研究を行うことを目的としている。これまでの歴史を振り返ってみてもパルス中性子で偏極中性子散乱実験の実現はほとんど成されておらず、特に POLANO の基本設計として目指す 100meV 程度までの高エネルギー偏極中性子散乱実験が可能な分光器は唯一無二となる(本当の意味での高エネルギーではないが、これまで実現しているエネルギー領域に比べてということ)。この高エネルギーパルス中性子の偏極散乱実験実現のためには多くの克服すべき課題があり、我々はこれまでのチョッパー分光器設計のノウハウを最大限に生かし、POLANO 実現に向けて邁進してきた。幸運にも大型予算の獲得と KEK からの継続的なプロジェクト経費により機器開発と装置建設も進み、今年度に初の中性子ビーム受け入れを果たした。チョッパーなど各機器の稼働試験、大型真空槽の真空度試験、検出器の健全性確認、YUI および HANA での遠隔制御・データ描画など多くの調整と試験をおこない、現在までに「非」偏極中性子での測定準備が整いつつある。

パルス中性子の偏極(偏極度解析)実験は世界的にみても新しい試みであり、多くの新しい技術や経験を必要としている。特に、POLANO においても偏極技術開発や磁場環境整備はこれまでに多くの時間と労力を費やし進めてきた。高エネルギー偏極を視野に入れた動的核偏極技術の検討をおこない、また ^3He スピンフィルターも偏極率 70%を実現するに至った。ガイド磁場の設計と試料位置における磁場のための非対称ヘルムホルツコイルとその冷却システムの開発もおこなった。今後も引き続き偏極用解析環境や試料環境の開発と整備を含めた機器開発をおこなう。現在は非偏極ビームでの調整を行っているが、今後更なるコミッショニングを経て、ビーム・各種周辺機器の整備・調整がまとまれば、偏極機器の整備(偏極子、磁場環境、検極子など)と調整を進め、偏極中性子散乱のコミッショニングへとつなげてゆく。講演ではビーム受け入れを果たして、これまでの建設状況と機器・技術開発の現状、進捗状況を報告し、これからの予定と目指すサイエンスについて議論する。